

## Intégration des isotopes à la modélisation couplée hydrogéochemique

La caractérisation et la modélisation des interactions eaux-roches impliquées dans les processus est indispensable pour évaluer correctement l'impact des activités humaines sur l'environnement en particulier la qualité des eaux et des sols. Cela passe par le développement d'outils de modélisation hydrogéochemiques capables de rendre compte de la complexité hydrogéologique du milieu naturel et de la complexité minéralogique et géochimique des interactions eaux-roches qui s'y produisent.

À la lumière des développements menés sur l'utilisation des approches du traçage isotopique pour l'étude des processus d'altération, il apparaît clairement aujourd'hui que les approches de modélisation feraient des progrès considérables si les modèles hydrogéochemiques actuels, qui reposent sur la modélisation du comportement des éléments majeurs, pouvaient intégrer la modélisation des traceurs isotopiques. Ces outils apporteront en effet des contraintes fortes sur la nature des minéraux primaires et secondaires impliqués dans les interactions eaux-roches mais aussi sur les cinétiques de dissolution des roches et minéraux, autant de paramètres importants à contraindre et difficiles (voire impossible) à évaluer par les seules approches de modélisation des éléments majeurs. De tels modèles n'existent pas aujourd'hui.

L'objectif du travail de doctorat est de construire un modèle géochimique sophistiqué capable de décrire les cinétiques de réactions (dissolution/précipitation) d'un cortège complet de minéraux primaires d'une roche réservoir et des phases secondaires possibles (carbonates, silice, argiles, sulfures), et intégrant la modélisation des traceurs isotopiques.

Le travail de thèse comprendra trois volets :

1. *Intégration des isotopes dans un code de transport réactif existant.*

Le laboratoire a une grande expérience dans le développement et la mise en œuvre d'outils de simulation associant l'écoulement, le transport et les interactions eau-solutés-roches. Dans cette phase, le travail consistera à (i) identifier les méthodes numériques nouvelles permettant d'améliorer la robustesse et la rapidité des codes de calcul du laboratoire, (ii) formuler les équations de bilan intégrant les principaux processus réactionnels pour les isotopes et (iii) résoudre et intégrer ces équations dans le code existant.

2. *Couplage au modèle hydrodynamique.*

L'intégration des isotopes dans le modèle géochimique et la volonté de se rapprocher des conditions réelles nécessite un couplage avec une hydrodynamique 3D. En effet, les réactions de précipitation-dissolution peuvent modifier de manière significative les propriétés de transfert du milieu (porosité, perméabilité) et donc impacter l'hydrodynamique.

3. *Validation sur des données de terrain.*

Le LHyGeS participe au suivi géochimique et isotopique de plusieurs bassins versants pour lesquels on dispose de nombreuses données hydrologiques, géochimiques et isotopiques. Ces données seront utilisées pour évaluer les capacités de simulation du code de calcul développé au cours du travail.

### ***Profil du candidat***

Goût prononcé pour la programmation, connaissance en méthodes numériques et en géosciences.

### ***Encadrement de thèse :***

Direction : Philippe ACKERER (modélisation numérique appliquée à l'hydrogéologie – ackerer@unistra.fr)  
Co-encadrants : Yann LUCAS (modélisation hydrogéochemique – ylucas@unistra.fr) en collaboration avec Bertrand FRITZ (géochimie et modélisation géochimique – bfritz@unistra.fr)

**Lieu : LHYGES, Université de Strasbourg**

## **Integration of isotopes into coupled hydrogeochemical modeling**

Characterization and modeling of water-rock interactions involved in rock weathering is essential to properly assess the impact of human activities on environment, particularly water and soil quality. This requires the development of hydrogeochemical modeling tools able to account for the hydrogeological complexity of the natural environment and the mineralogical and geochemical complexity of the occurring interactions between water-rocks.

From developments carried out on the use of isotope tracing approaches to the study of weathering processes, it is clear today that the modeling approaches would considerably improve if current hydrogeochemical models based on major elements could include isotopic tracers. These tools indeed provide strong constraints on the nature of primary and secondary minerals involved in water-rock interactions but also on rocks and minerals dissolution kinetics, all important parameters to constrain and difficult (or impossible) to be assessed by the only modeling approaches with major elements. Such models do not exist today.

The ultimate goal of this project is to build a sophisticated geochemical model able to describe the kinetics of reactions (dissolution / precipitation ) of numerous primary minerals of a reservoir rock and possible secondary phases (carbonates, silica, clays, sulfides), and to integrate isotopic tracers into models.

The thesis will be divided into three steps:

### *1. Integration of isotopes in a reactive transport code*

The laboratory has a great experience in developing and using numerical codes which describes flow, transport and water-rock interactions. During this step, the candidate will have (i) to identify new numerical methods to improve accuracy and efficiency of these numerical codes, (ii) to write mass balance equations of the isotopes' transport processes and (iii) to solve and implement these equations in the existing code.

### *2. Integration in a flow model*

Integrating isotopes into a geochemical model and getting closer to real conditions requires an efficient coupling with a 3D flow model. Precipitation/dissolution may affect significantly the flow parameters (porosity, permeability) and therefore the velocity field.

### *3. Experimental validation sites.*

LHyGeS is involved in long-term measurements of solutes and isotopes in different water catchments. Numerous hydrological, geochemical and isotopes data have been collected over years and will be used to evaluate the capacity of the numerical code.

### ***Abilities of the candidate***

Good linking for programming, good knowledge in numerical methods and geosciences.

### ***thesis supervision :***

Direction : Philippe ACKERER (numerical modeling applied to hydrogeology – ackerer@unistra.fr)

Co-supervisors : Yann LUCAS (hydrogeochemical modeling– ylucas@unistra.fr) in collaboration with Bertrand FRITZ (geochemistry and geochemical modeling – bfritz@unistra.fr)

**Location : LHYGES, Université de Strasbourg**